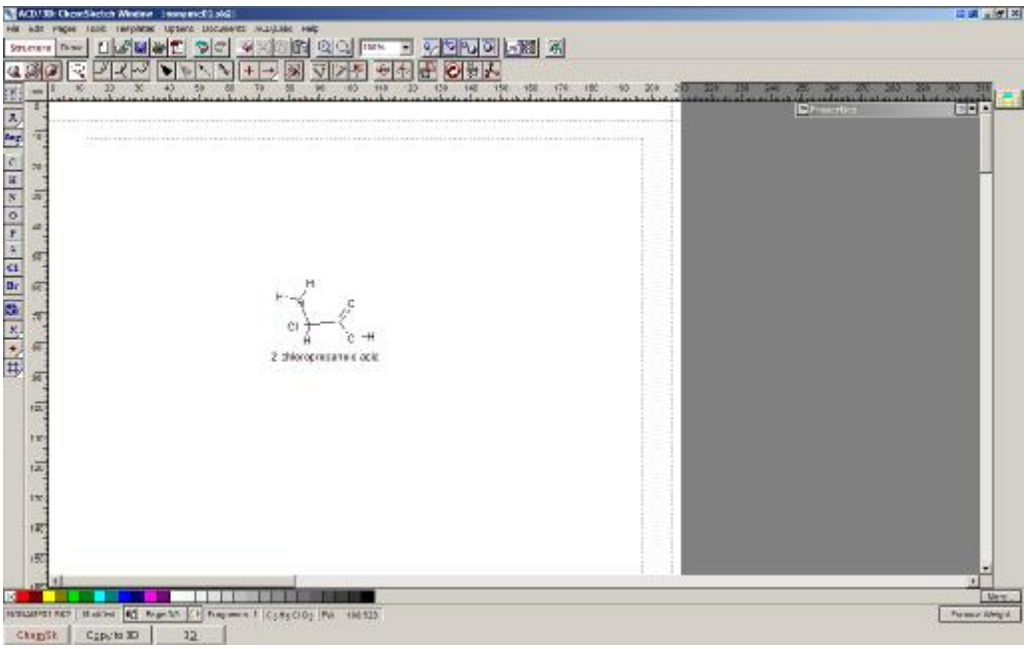
MODE D'EMPLOI DE CHEMSKETCH

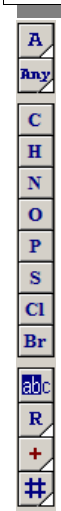
Chimie

Apprendre à créer des molécules avec le logiciel chemsketch, à récupérer des caractéristiques et à afficher ces molécules.

I.INTERFACE

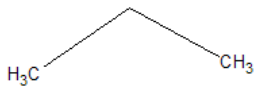


II.CONSTRUCTION D'UNE MOLÉCULE SIMPLE.



Nous allons créer la molécule de propane, de formule C_3H_8.

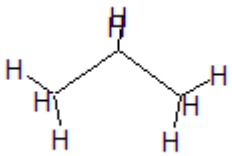
- Lancer le logiciel. Cliquez sur l'icône C, à gauche de l'écran.
- Cliquez sur l'écran, puis lâchez. La molécule CH_4 est créée.
- Double-cliquez sur CH_4, et tirez 2 fois, pour obtenir enfin la molécule désirée.



Cette molécule n'a pas la forme réelle de la molécule.

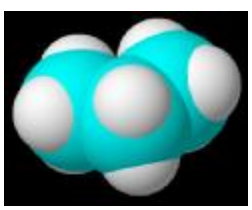
- Pour cela, cliquez sur l'icône *3DOptimization,* située dans la barre d'outils supérieure.

On obtient la molécule suivante :



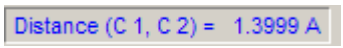
III.VISUALISATION EN 3 DIMENSIONS

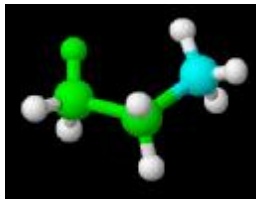
- Pour visualiser la molécule en 3 dimensions, il faut passer dans le module *Show3D*, accessible normalement par le menu ACD/Labs.
- Ce module permet de visualiser la molécule sous différents aspects, de la faire pivoter, de mesurer les longueurs des liaisons et les angles.
- Les différents types d'affichage sont accessibles par la barre d'icône ou par un clic droit.



III.1 Mesures des longueurs

- Passez en affichage "balls and sticks" et cliquez sur l'icône "Calculate Distance..."
- Cliquez sur les deux atomes de la liaison, qui s'affichent en vert.
- La valeur de la longueur de liaison s'affiche dans la barre d'état au bas de la fenêtre.





III.2 Mesure des angles

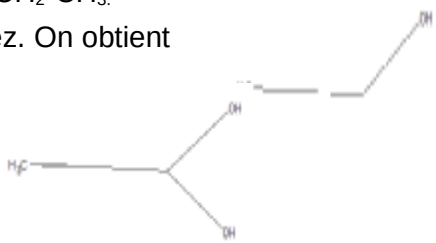
Le principe est le même, mais il faut sélectionner 3 atomes, dans l'ordre, définissant l'angle que l'on veut mesurer

IV.MOLÉCULE COMPLEXE

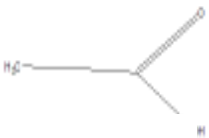
Pour apprendre à utiliser différents atomes, créer des liaisons doubles et des ramifications, nous allons construire la molécule **d'acide 2-chloropropanoïque : $C_2H_4ClCOOH$**

On commence par construire le squelette carbonée, ici 3 atomes de carbone.

- Choisir l'atome de carbone et construire la molécule CH_3-CH_2-CH_3.
- Choisir l'atome O, cliquez sur le dernier groupe CH_3 et tirez. On obtient une molécule ayant cet aspect.

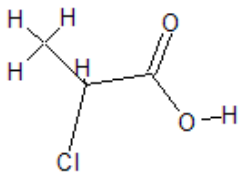


- Recommencez l'étape précédente. On obtient alors :
- Cliquez sur une des 2 liaisons C-OH, pour créer une double liaison C=O. La structure a l'aspect suivant.



Il nous reste à placer un atome de chlore sur le carbone du deuxième groupe CH_2.

- Choisissez l'atome de chlore : Cl
- Cliquez sur le groupe CH_2 et tirez.
- Enfin pour obtenir la forme réelle, cliquez sur l'icône "3D Optimization".



V.INFORMATIONS

Chemsketch permet d'obtenir de nombreuses informations à partir de la structure créée telles que la densité, l'indice de réfraction, la masse molaire ou simplement le nom.

V.1 Nom de la molécule

- Item de menu : Tools / Generate Name From Structure

  Le nom s'affiche au bas de la molécule, il est en anglais.

V.2 Masse molaire

- Item de menu : Tools / Calculate / Formula Weight

La masse molaire s'affiche dans une fenêtre.